QMI-6 Kvantová statistika – matice hustoty

OPAKOVÁNÍ:

statistický soubor stavů: $\{|\psi_i\rangle, p_i\}_{i\in M}$ $\longleftrightarrow$ operátor hustoty $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

normovanost: $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$ čistý stav: $\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1 \iff \rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

vlastnosti: $\rho = \rho^+$ positivně definit $\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle \geq 0 \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}$

MĚŘENÍ:

- přechod do stavu $|\phi\rangle$ ... $p_\phi = \langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{P}_\phi\} = \mathrm{Tr}\{\hat{P}_\phi\hat{\rho}\hat{P}_\phi\}$

- měření veličiny $\hat{A}$: $\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}\}$

  $p_a = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{P}_a\} = \mathrm{Tr}\{\hat{P}_a\hat{\rho}\hat{P}_a\}$ ... stav po měření: $\tilde{\rho}_a = \frac{1}{p_a}\hat{P}_a\hat{\rho}\hat{P}_a$

stav po měření kde neznáme výsledek měření: $\tilde{\rho} = \sum_a \hat{P}_a\hat{\rho}\hat{P}_a \left(= \sum_a \tilde{\rho}_a p_a\right)$

ČASOVÝ VÝVOJ:

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$ ... pro $\partial_t\hat{H} = 0$ .. $\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}_0\hat{U}^+(t)$

kvantová Liouvillova rovnice

PŘÍKLAD:

systém ... $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ .. spin $1/2$ ... $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x, ..)$

$|+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $|-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$ .. $|x+\rangle$

$\hat{\rho}_+ = |+\rangle\langle+| = \begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$ $\hat{\rho}_- = |-\rangle\langle-| = \begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}$

$$\boxed{|x\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle)}$$

$= \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\hat{\rho}_{x\pm} = |x\pm\rangle\langle x\pm| = \frac{1}{2}\left(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| \pm |+\rangle\langle-| \pm |-\rangle\langle+|\right)$$

$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&\pm1\\\pm1&1\end{pmatrix}$

čisté stavy

směšený stav .. $\{(|+\rangle, p=\frac{1}{2}), (|-\rangle, p=\frac{1}{2})\}$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|\right)$$

nekoherentní

členy navíc v koherentní superpozici

Terminolog. pozn.: $\varrho_{nn} = \langle n|\varrho|n\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat\varrho\, |n\rangle\langle n|\}$

báze $\{|n\rangle\}_n$ diag. populace $|n\rangle$ (obsazení)

nediagonální: ϱ_{mn} koherence

Př: $|\psi\rangle = \alpha|n\rangle + \beta|m\rangle$

$$\hat\varrho = \begin{array}{c|cc} & n & m \\ \hline n & |\alpha|^2 & \beta\alpha^* \\ m & \beta^*\alpha & |\beta|^2 \end{array} = |\psi\rangle\langle\psi|$$

neboli $\{ (|n\rangle, |\alpha|^2), (|m\rangle, |\beta|^2) \}$

ϱ pozit. definitní $\Rightarrow$ $|\varrho_{mn}|^2 \leq \varrho_{mm}\varrho_{nn}$

statistická fyzika ... entropie stavu

def: Entropie stavu $\sigma = -\mathrm{Tr}\{\underbrace{\varrho \ln \varrho}_{f(\varrho)}\} = -\sum_\lambda \lambda \ln \lambda$

ϱ .. λ $|\psi_\lambda\rangle$ .. $\{(|\psi_\lambda\rangle, \lambda)\}$

pozn.: .. pravd. rozdělení $\{p_1 \dots p_n\} \rightarrow$ Shannon $-\sum_n p_n \ln p_n$

vlastnosti:
- $\sigma \geq 0$ ...
- $\sigma = 0 \Leftrightarrow \hat\varrho$ čistý stav $\lambda \in \{1, 0, 0, 0, \dots\}$
- σ .. nabývá maxima pro $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n$

  $1 = \mathrm{Tr}\,\varrho = \sum\lambda = n\lambda \rightarrow \lambda = 1/n$

  obecně $\hat\varrho = \frac{1}{\dim\mathcal{H}}\hat{I}$

statistická fyzika: max. entropie pro stav kompat. s inf. o syst.

"kanonický soubor" .. $\langle H\rangle = \text{konst} = U$

$\rightarrow$ $\mathrm{Tr}\{\hat\varrho\hat H\} = U$ $\leftarrow$ max entropie za podm.

řešení: Boltzmanova rozdělení $\hat\varrho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$ $Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}$

β .. Langrange multiplik. $\rightarrow \beta = \frac{1}{kT}$ fyzikální

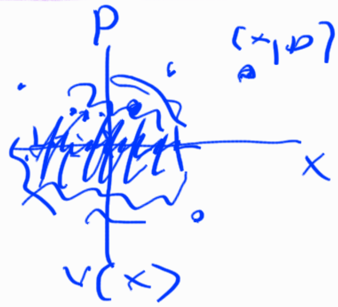
Wignerova reprezentace – QM meel ve fáz. prost.

- Hustota pravd nalezení částice v bodě x

$|x\rangle \qquad p(x) = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}|x\rangle\langle x|\} = \langle x|\hat{\rho}|x\rangle \ldots \Leftarrow$

operátor hustoty .. $\rho_{xx'} \equiv \langle x|\rho|x'\rangle = \rho(x,x')$

- Klasická statistická fyz. ve fáz prostoru



(x,p) --- stat. soub. $f(x,p)$

$\rho(x) = \int f(x,p)\,dp$

$\rho(p) = \int f(x,p)\,dx$

$T = \frac{p^2}{2m} \qquad V(x)$

$a(x,p)$

$\langle a\rangle = \int a f\,dx\,dp$

$\subset$ QM .. $\rho(p) = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}|p\rangle\langle p|\} = \langle p|\rho|p\rangle$

$\boxed{\text{Def:}}$ Wignerova reprezentace matice hustoty:

$$\rho_w(x,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\langle \vec{x}-\tfrac{1}{2}\vec{x}'|\hat{\rho}|\vec{x}+\tfrac{1}{2}\vec{x}'\rangle e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}'}\,d\vec{x}' ,$$

$\boxed{\rho(x,x')}$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\langle \vec{p}-\tfrac{1}{2}\vec{p}'|\hat{\rho}|\vec{p}+\tfrac{1}{2}\vec{p}'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{x}\vec{p}'}\,d\vec{p}'$$

$\boxed{\rho = \rho^{+} \Rightarrow \rho_w \in \mathbb{R}}$

1D $\qquad$ 3D

Wignerova distribuce

vlastnosti:

- $\rho(\vec{x}) \equiv \mathrm{Tr}\{\rho|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\} = \int \rho_w(\vec{x},\vec{p})\,d\vec{p}$

- $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = \iint \rho_w(x,p)\,dx\,dp = 1$

- pozorovatelné veličiny ve Wignerově reprezentaci

$$A_w(x,p) = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x-\tfrac{1}{2}x'|\hat{A}|x+\tfrac{1}{2}x'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}px'}\,dx'$$

jako klas.

$\boxed{\text{Př:}}$ $\quad$ x repr: $\qquad\qquad\qquad$ w-repr

$\hat{V} = V(x)\,\delta(x-x') \longrightarrow V_w(x,p) = V(x)$ —

$\hat{T} = \frac{p^2}{2m}\,\delta(p-p') \longrightarrow T_w(x,p) = \frac{p^2}{2m}$ —

• $\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\{\rho A\} = \iint \rho_w(x,p)\, A_w(x,p)\, dx\, dp$

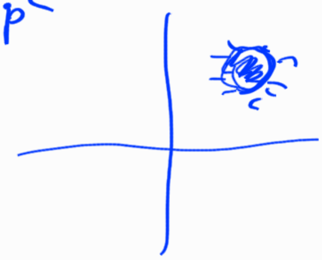
(jako klasicky)

ale neklasické:

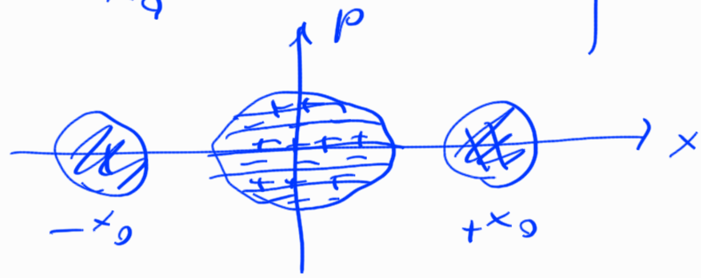
! $\rho(x,p)$ může být záporné ! ... ne pravděpod. interpret.

PŘ: Gauss balík Δx, $\Delta p = \frac{\hbar}{\Delta x}$, $\sim e^{-x^2/4\Delta x^2}$

$$\to \rho_w(x,p) = \frac{1}{\pi\hbar}\, e^{-x^2/2\Delta x^2}\, e^{-p^2/2\Delta p^2}$$



koherentní suma .. $+x_0$ $-x_0$



• Matice hustoty pro složený a redukovaný syst.

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ... $|n_1\rangle|n_2\rangle$

↪ $\hat\rho$ na $\mathcal{H}$ .. $\mathrm{Tr}\,\hat\rho = \sum_{n_1 n_2} \langle n_1|\langle n_2|\hat\rho|n_1\rangle|n_2\rangle$

$= \sum_{n_1 n_2} \hat\rho_{n_1 n_2, n_1 n_2}$

měření na podsyst 1

... $\hat A_1 = \hat A_{\mathcal{H}_1} \otimes I_{\mathcal{H}_2}$

$P_a = \hat P_{a\mathcal{H}_1} \otimes I_{\mathcal{H}_2}$

a .. $p_a = \mathrm{Tr}\, P_a \rho$

$\langle \hat A_1 \rangle = \mathrm{Tr}\cdot A_1 \rho$

$$= \sum_{n_1 n_2} \sum_{n_1' n_2'} \langle n_1|\langle n_2|\hat A_1|n_1'\rangle|n_2'\rangle \langle n_1'|\langle n_2'|\hat\rho|n_1\rangle|n_2\rangle$$

$\hat A \otimes I$ $\quad \delta_{n_2 n_2'}$

$$= \sum_{m_1 m_1'} \langle m_1 | A | m_1' \rangle \sum_{m_2} \langle m_1' | \langle m_2 | \rho | m_1 \rangle | m_2 \rangle$$

$\rho^{(1)}_{m_1' m_1}$ ← redukovaná ρ

$$= \sum_{m_1 m_1'} A_{m_1 m_1'} \rho^{(1)}_{m_1' m_1} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_1} \{ \hat{A} \hat{\rho}^{(1)} \}$$

Def: redukovanou matici hustoty z prostoru $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ na $\mathcal{H}_1$ nazýváme:

pozn.: redukce dimenze z matice: $(D_1 \cdot D_2) \to D_1^2$

$$\hat{\rho}^{(1)} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_2} \hat{\rho} \qquad \text{neboli}$$

$$\hat{\rho}^{(1)}_{m_1 m_1'} = \sum_{m_2} \langle m_1 | \langle m_2 | \hat{\rho} | m_1' \rangle | m_2 \rangle$$

---

poznámky:
- ∀ měření veličin na $\mathcal{H}_1$ $(\hat{A} \otimes \hat{I})$ lze jednoznačně popsat pomocí $\hat{\rho}^{(1)}$ … obsahuje ∀ info nezbytné pro popis měření na $\mathcal{H}_1$
- $\hat{\rho}^{(1)}$ má ∀ vlastnosti požadované od mat. hust.: $\rho^{+} = \rho$, ∀ $\langle m | \rho | m \rangle \geq 0$, $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$ ⇒ ∃ stat. soubor
- speciální případ … $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$
  pak … $\hat{\rho}^{(1)} = \mathrm{Tr}_2 \hat{\rho} = \hat{\rho}_1$ $\quad \hat{\rho}^{(2)} = \mathrm{Tr}_1 \hat{\rho} = \rho_2$
- $\hat{\rho}^{(1)}$ může představovat smíšený stav i když $\hat{\rho}$ je čistým stavem.
- Je možné napsat rovnici pro časový vývoj $\hat{\rho}^{(1)}$ … H_1 + interakce $\mathcal{H}_2$

otevřené systémy … Mistrovská rovnice (Master eq)

- ... vliv prostředí, dekoherence, disipace, relaxace,